可積分量子スピン系における異常な準位交差
— 量子 XXZ スピン鎖に出現する sl_2 ループ代数の対称性 —

お茶の水女子大学 理学部物理　出口 哲生[1]，工藤 和恵[2]

フォン・ノイマンとウィーグナーの定理によれば、同じ対称性をもつ二つのエネルギー固有値が縮退することは非常に稀である。しかし量子 XXZ スピン鎖では、その異方性変数 Δ がある特殊値の場合に系の対称性が拡大し、sl_2 ループ代数という非可換対称性が出現する。このとき、可積分量子系に特有のダイナミカルな保存量が全て同時に縮退する。さらに、その縮退次元は格子サイズに関して指数関数的に増大する。

1 はじめに

1.1 準位非交差則について

ランダウの量子力学の教科書には、2 原子分子の電子項の交差に関して、次のような議論がある [1]。ハミルトニアンの摂動項がある変数に依存し、その変数を連続的に変化させるとき、同じ対称性をもつ二つの固有状態のエネルギー固有値は決して交差しない。このような準位非交差則は最初にフントによって提案され、フォン・ノイマンとウィーグナーによって、言わばランダム行列の意味で証明された [2]。実対称行列に関する結果を述べると、同じ対称性量子数をもつ二つの固有値が交差するためには、系を記述する変数のうち少なくとも 2 つを調整しなければならない。この 2 変数とエネルギーの関係を表すグラフおいて、偶然縮退はその曲面の円錐形部分の頂点に対応する。直感的には、ランダムに行列要素を与えたときに同じ対称性をもつ二つの準位が縮退することは非常に稀である、と表現できる。そして厳密に言えば、実際の系で準位非交差則が破られることがあっても良い。分子の励起状態のエネルギー曲面において、円錐形部分が議論されている [3]。量子ビリヤード系でも、偶然縮退が詳しく研究されている [4]。

1.2 可積分量子系の準位縮退—1 次元ハバード模型の場合

可積分量子系において準位交差を見出したとき、それが偶然縮退かどうか断定することは実は簡単でない。可積分量子系には準位縮退が多数出現する。しかし、偶然縮退かどうかの判定基準が自明ではないのである。

多くの可積分量子系には「交換する転送行列」が存在する。量子ハミルトニアンはその対数微分で与えられ、転送行列をスペクトラルパラメータで展開するとその展開係数はハミルトニアン

[1] E-mail: deguchi@phys.ocha.ac.jp
[2] E-mail: kudo@degway.phys.ocha.ac.jp

と交換する演算子の列を与える。こうして、交換する転送行列をもつ可積分量子系には、十分な数（自由度の数と同じ数）の保存量が存在する。

エネルギー固有値は縮退しても、より高次の保存量では縮退が解消している場合がある。このとき、準位非交差則の破れの判定は「対称性」の定義に依存する。すなわち、対称性演算子として相互作用変数に依存しないもののみを考えるか、あるいは一般化して相互作用変数に依存するものも含めるかという問題である。この問題は、物理系ごとに議論する必要がある。

１次元ハバード模型はベーテ仮説を用いて厳密に解ける。Heilmann-Lieb は、対称性演算子を相互作用変数（ハバード結合定数 U ）に依存しないものに限定すると、同じ対称性をもつ二つの準位が交差する例が多数存在することを示した [5]。ベンゼン環のように６格子点からなる周期的なハバード鎖において、変数 U に関する準位交差の例を数値的に示し、準位非交差則の反例であると結論した。一方ごく最近 Shastry 達は、１次元ハバード模型のダイナミカル保存量を議論して、準位縮退が高次の保存量では解消する例を多数示した。そして、対称性演算子の定義の拡大により偶然縮退は解消する、という解釈を示した [6]。

1.3 可積分量子系の準位縮退ー量子 XXZ 鎖の場合

以上の研究の流れでは、可積分系の場合にも高次の保存量を採用すれば縮退は解消する、という「常識的」理解が可能であった。ところが XXZ スピン鎖に関する最近の研究 [7] を調べると、この「常識」は覆されることが分かる。

XXZ 鎖のハミルトニアンは、パウリ行列 $\sigma^a \, (a = X, Y, Z)$ を用いて次のように表される。

$$\mathcal{H}_{XXZ} = -J \sum_{j=1}^{L} \left(\sigma_j^X \sigma_{j+1}^X + \sigma_j^Y \sigma_{j+1}^Y + \Delta \sigma_j^Z \sigma_{j+1}^Z \right) . \tag{1}$$

変数 Δ を異方性変数とよぶ。ハイゼンベルグ結合定数は $(J_X, J_Y, J_Z) = (J, J, J\Delta)$ となり、Z方向のみ異なる。以下、$\Delta = (q + q^{-1})/2$ とおく。変数 q は量子群の q パラメターに対応する。

変数 q が１のべき根のとき、XXZ スピン鎖の対称性が拡大して sl_2 ループ代数という非可換代数が XXZ ハミルトニアン $\mathcal{H}_{XXZ}$ と交換することが最近明らかになった [7]。その縮退次元は格子点の総数 L に関して指数関数的に増加する。ある整数 N に対して、q 変数が１の $2N$ 乗根 ($q^{2N} = 1$) であるとする。このとき、縮退次元の最大値は $N 2^{L/N}$ で与えられる [8]。さらに、sl_2 ループ代数は XXZ スピン鎖の量子転送行列とも交換（反交換）する [7]。すなわち、全てのダイナミカル保存量が同時に縮退してしまう。

図では $L = 6$ の場合に、異方性変数 Δ を変化させたときの全てのエネルギー固有値のフローが示されている。矢印で示された部分が sl_2 ループ代数から導かれたものと現段階で判定できた縮退である。$\Delta = \pm 0.5$ の場合、q は１の３乗根あるいは６乗根であり、縮退度は１２である。($2^{6/3} \times 3 = 12$。) $\Delta = 0$ の場合は XY 模型すなわち自由フェルミオンの系に対応する。矢印の示す準位交差における縮退次元は１６である。($2^{6/2} \times 2 = 16$)

XXZ ハミルトニアンのスペクトルには多数の準位交差が見られるが、しかし、これら全てが sl_2 ループ代数に対応しているわけではない。どの準位交差に対しても、（変数 q に依存する）対

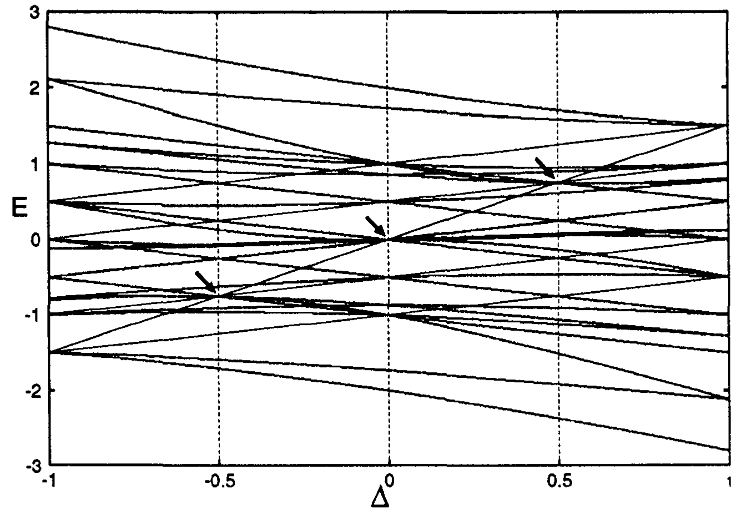

図 1: ループ代数に対応する準位交差の例 ($L=6$、全部で６４次元の状態空間)

称性演算子が対応している。

一般に、相互作用変数のある値で準位交差が生じることと、その値において量子系の対称性が拡大していることは、有限自由度系の場合には等価である。従って、準位交差を調べることは、変数の特殊値でのみ成立する系の対称性を見出すことに対応する。

2 XXZ 鎖における sl_2 ループ代数の対称性

2.1 $sl(2)$ ループ代数の定義

ループ代数に関して簡単に説明する。リー代数 $sl(2,\mathbf{C})$ の生成演算子を T^a と表そう。このとき $sl(2)$ ループ代数の演算子は、複素変数 z と任意の整数 n に対して、$T^a \otimes z^n$ と表される。n は任意なので、演算子は無限個存在する。変数 z は単位円上の点 $z=\exp(i\theta)$ を表すと解釈すると、単位円から単位円上への無限小変換のフーリエ成分がループ代数の生成子となっている。ループ代数の交換関係は、次式で定められる。

$$[T^a \otimes z^m, T^b \otimes z^n] = [T^a, T^b] \otimes z^{m+n} \tag{2}$$

sl_2 のシュバレー基底 e、f、 h を定義する。量子力学の角運動量の昇降演算子 $J^{\pm}$ と角運動量の z 成分 J^z を用いると、それぞれ次のように対応する。$e=J^+$、$f=J^-$、$h=2J^z$。そして、次の交換関係が成立する。$[e,f]=2h, \quad [h,e]=2e, \quad [h,f]=-2f$ 。

sl_2 ループ代数に中心 c を加えたものを、アファイン・リー代数 $\hat{sl}_2$ とよぶ。ここで中心とは、全ての元と交換する要素のことである。アファイン・リー代数 $\hat{sl}_2$ のシュバレー基底は、sl_2 のシュバレー基底 e、f、h を用いて次のように表示される。

$$h_0 = c - h\otimes 1, \qquad e_0 \;=\; f\otimes z, \qquad f_0 = e\otimes z^{-1},$$

$$h_1 = h\otimes 1, \qquad e_1 \;=\; e\otimes 1, \qquad f_1 = f\otimes 1 \tag{3}$$

そして、これらの演算子はアファイン・リー代数 $\hat{sl}_2$ を生成し、次の定義関係式を満たす。

$$\begin{aligned}[][h_0,h_1] &= 0 \quad [h_i,e_j]=a_{ij}e_j\,, \quad [h_i,f_j]=-a_{ij}f_j\,, \quad [e_i,f_j]=\delta_{ij}h_j\,, \qquad (i,j=0,1)\\ [e_i,[e_i,[e_i,e_j]]] &= 0, \quad [f_i,[f_i,[f_i,f_j]]=0 \qquad (i,j=0,1, \quad i\neq j)\end{aligned} \tag{4}$$

ここでアファイン・リー代数 $\hat{sl}_2$ のカルタン行列 (a_{ij}) は次式で定義される。

$$\begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} \\ a_{10} & a_{11}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 2\end{pmatrix} \tag{5}$$

2.2 XXZ 鎖におけるループ代数の演算子

量子群 $U_q(sl_2)$ の生成演算子 $S^{\pm}$ と S^Z は、次のような交換関係を満たす。

$$[S^Z, S^{\pm}] = \pm S^{\pm}\,, \qquad [S^+, S^-] = \frac{q^{2S^Z} - q^{-2S^Z}}{q-q^{-1}} \tag{6}$$

以後、次のような q アナログの記号を用いる。正整数 n に対して $[n]=(q^n-q^{-n})/(q-q^{-1})$ 、そして $[0]=1$ とする。また、 階乗の q アナログを $[n]!=\prod_{k=1}^{n}[k]$ で定義する。

長さ L の 1 次元鎖に作用する量子群 $U_q(sl_2)$ の演算子の行列表現は、次で与えられる。

$$q^{S^Z} = q^{\sigma^Z/2}\otimes\cdots\otimes q^{\sigma^Z/2} \tag{7}$$

$$S^{\pm} = \sum_{j=1}^{L} q^{\sigma^Z/2}\otimes\cdots q^{\sigma^Z/2}\otimes\sigma_j^{\pm}\otimes q^{-\sigma^Z/2}\otimes\cdots\otimes q^{-\sigma^Z/2} \tag{8}$$

演算子 $S^{\pm}$ のべき乗から、演算子 $S^{\pm(N)}=(S^{\pm})^N/[N]!$ を定義する。次に q を q^{-1} に置き換え

$$T^{\pm} = \sum_{j=1}^{L} q^{-\sigma^Z/2}\otimes\cdots q^{-\sigma^Z/2}\otimes\sigma_j^{\pm}\otimes q^{\sigma^Z/2}\otimes\cdots\otimes q^{\sigma^Z/2}\,, \tag{9}$$

を導入し、演算子 $T^{\pm(N)}$ を $T^{\pm(N)}=(T^{\pm})^N/[N]!$ で定義する。

$q^{2N}=1$ のとき、$S^{\pm(N)}$、$T^{\pm(N)}$ と S^Z を、sl_2 ループ代数の生成子と次式で対応させる。

$$\begin{aligned} & e_0 = S^{+(N)}, \quad f_0 = S^{-(N)}, \quad e_1 = T^{-(N)}, \quad f_1 = T^{+(N)}, \\ & t_0 = -t_1 = -(-q)^N S^Z/N\,, \end{aligned} \tag{10}$$

$S^Z\equiv 0\ (\mathrm{mod}\, N)$ なるセクターにおいて、これらはアファイン・リー代数 $\hat{sl}_2$ の定義関係式 (4) を満たす [7]。アファイン・リー代数 $\hat{sl}_2$ で $c=0$ とおくと sl_2 ループ代数が導かれるので、演算子 $S^{\pm(N)}$ および $T^{\pm(N)}$ と S^Z は sl_2 ループ代数を生成する。

2.3 転送行列およびXXZハミルトニアンとの交換

$T_{6V}(v)$ を XXZ 鎖の量子転送行列とする。(すなわち、six-vertex model の転送行列である。) $q^{2N}=1$ のとき、$S^Z \equiv 0 \pmod N$ なるセクターで、次の交換（反交換）関係が成立する。

$$S^{\pm(N)}T_{6V}(v)=q^N T_{6V}(v)S^{\pm(N)}, \qquad T^{\pm(N)}T_{6V}(v)=q^N T_{6V}(v)T^{\pm(N)} \tag{11}$$

XXZ ハミルトニアンは転送行列の対数微分なので、$S^Z \equiv 0 \pmod N$ なるセクターにおいて、次の交換関係が導かれる。

$$[S^{\pm(N)}, H]=[T^{\pm(N)}, H]=0. \tag{12}$$

3 まとめ

1次元ハバード模型とは異なり、XXZ 鎖の sl_2 ループ代数の対称性に対応する縮退では、無限個の保存量が全て同時に縮退する。さらに、縮退次元は非常に大きい。この例を偶然縮退とよぶかどうかは「対称性」の定義に依存するかもしれない。しかし、このように奇妙な準位交差の存在を認識することは重要である。おそらく、新しいタイプの準位交差であろう。

量子 XXZ 鎖の縮退に関連して、準位統計などエネルギー固有値の集団の振る舞いを調べること興味深い課題の一つである。しかし、紙数が尽きたので、他の機会に議論したい。

謝辞

基研研究会の世話人の先生方に感謝します。本研究は科研費 (14702012) の支援を受けています。

参考文献

[1] ランダウ・リフシッツ、「量子力学２」、東京図書

[2] J. von Neumann and E. Wigner, Phys. Zeit. **30** (1929), 467.

[3] M. Vaz Pires, C. Galloy, and J. C. Lorquet, J. Chem. Phys. **69** (1978), 3242.

[4] M.V. Berry and M. Wilkinson, Proc. Roy. Soc. London Ser. A **392** (1984), 15.

[5] O.J. Heilmann and E.H. Lieb, Ann. N. Acad. Sci. **172** (1971), 583.

[6] E.A. Yuzbashyan, B.L. Altshuler, and B.S. Shastry, **35** (2002), 7525.

[7] T. Deguchi, K. Fabricius and B.M. McCoy, J. Stat. Phys.**102** (2001), 701.

[8] T. Deguchi, J. Phys. A: Math. Gen.**35** (2002), 879; Int. J. Mod. Phys. B **16** (2002), 1899.